

# ПРОГРАММА ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО АНАЛИЗА СЫРЬЯ И ПРОДУКТОВ ПРОЦЕССА ЦЕОФОРМИНГА

*И.А. Богданов, инженер-исследователь ОХИ ИШПР ТПУ,  
М.В. Киргина, к.т.н., доцент ОХИ ИШПР ТПУ,  
Д.М. Лукьянов, студент гр. 2Д8Б,  
Томский политехнический университет  
E-mail: dml4@tpu.ru*

## **Введение**

Углубление переработки углеводородного сырья остается актуальной задачей современной нефтегазовой промышленности. Решение данной задачи подразумевает использование всего сырья, извлекаемого на месторождениях нефти и газа. Шагом в направлении комплексной переработки углеводородов может служить вовлечение стабильного газового конденсата в процессы получения моторных топлив.

Стабильный газовый конденсат – это жидкая смесь углеводородов, которая состоит в основном из соединений, содержащих 5-7 атомов углерода, из которой удалены низкомолекулярные компоненты C1-C4.

Возможным способом получения топливных компонентов из стабильного газового конденсата является его переработка на цеолитном катализаторе – процесс цеоформинг [1]. В связи с возможным варьированием состава конденсата используемого в качестве сырья процесса интерес представляет создание математической модели данного процесса. Первым этапом создания математической модели процесса является формализация схемы химических превращений веществ. В данном случае предметом формализации были составы продуктов цеоформинга образца стабильного газового конденсата, полученные методом газожидкостной хроматографии согласно [2] с помощью хроматографа «Хроматэк-Кристалл 5000».

Продукты процесса в зависимости от условий его проведения насчитывают порядка 200-300 индивидуальных веществ. Многие вещества имеют концентрацию, близкую к нулевому значению и обладают схожими физико-химическими свойствами, являясь внутриклассовыми изомерами друг друга. В ходе формализации было проведено объединение индивидуальных веществ, обладающих похожими физико-химическими свойствами в более общие группы – псевдокомпоненты. Результатом формализации стал список, состоящий из 51-й позиции.

Применение компьютерных программ, позволяющих автоматически преобразовывать химические составы различных смесей углеводородов к составам, полученным формализацией, позволяет значительно облегчить и упростить процесс обработки экспериментальных данных как на начальных этапах моделирования, так и на завершающих, когда требуется провести оценку достоверности разработанной модели.

Целью данной работы является разработка компьютерной программы для автоматической обработки экспериментальных данных (сведения исследуемых хроматограмм процесса цеоформинга стабильных газовых конденсатов к формализованному списку).

## **Описание компьютерной программы**

Компьютерная программа реализована на языке Python с использованием встроенной библиотеки tkinter. Обработка хроматограмм происходит с помощью базы данных, которая является отдельным файлом формата .xlsx. База данных представляет собой четыре поля: ключ (название индивидуального вещества), численно-буквенное обозначение, компонент из формализованного списка, дата добавления.

В программе реализована возможность добавления новых веществ с присвоением им численно-буквенного обозначения и определенной группы из формализованного списка. Относительно схожих программ [3] достоинством разработанной программы является гибкость применения, которая заключается в адаптации программы под загружаемую базу данных. Это позволяет корректировать формализованный список или использовать формализованную модель другого процесса и производить обработку хроматограмм без редактирования кода программы.

Численно-буквенное обозначение хранит информацию о классе углеводорода и количестве в нем атомов углерода и служит для работоспособности дочернего окна добавления веществ в базу данных. Новые по отношению к базе данных вещества выводятся в левой части дочернего окна. На рисунке 1

представлен интерфейс главного и дочернего окна, в котором происходит добавление новых веществ из хроматограммы.

Результат обработки, представленный в правой таблице окна, может быть сохранен в формате .xlsx для последующей визуализации и анализа.

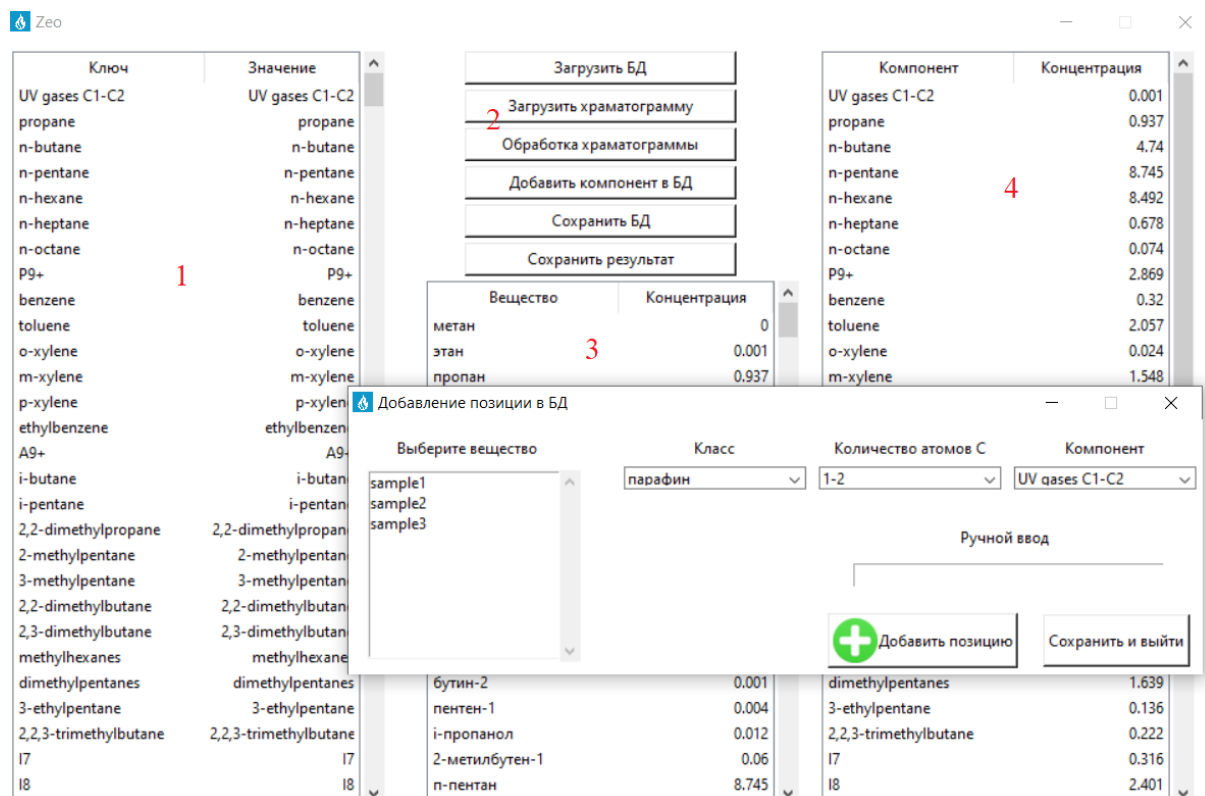


Рис. 1. Интерфейс программы

1 – загруженная база данных; 2 – кнопки управления; 3 – загруженная хроматограмма; 4 – результат обработки.

## Заключение

Разработанная компьютерная программа позволяет ускорить обработку экспериментальных данных (хроматограмм, сырья и продуктов, получаемых на хроматографе «Хроматэк Кристалл 5000»), может быть использована для похожих задач при моделировании других химико-технологических процессов при соответствующем оформлении базы данных.

*Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации № МК-351.2020.3.*

## Список использованных источников

1. Алтынов А.А., Богданов И.А., Темирболат А.М., Белинская Н.С., Киргина М.В. Исследование влияния состава сырья и технологических параметров на характеристики продуктов цеоформинга стабильного газового конденсата // «Нефтепереработка и нефтехимия». – 2019. – №2. – С. 9 – 14.
2. ГОСТ 32507 – 2013 Бензины автомобильные и жидкие углеводородные смеси. определение индивидуального и группового углеводородного состава методом капиллярной газовой хроматографии. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200108178>
3. Сахневич Б.В., Киргина М.В., Чеканцев Н.В., Иванчина Э.Д. Разработка модуля автоматизированной обработки данных хроматографического анализа для повышения эффективности процесса компаундирования товарных бензинов // «Известия Томского политехнического университета». – 2014. – №3. – С. 127 – 136.